

[Spectrochim. Acta, 34A, 771 1978)]

Infrared Spectra of Methanesulfonanilide and Its C-and N-Deuterated Compounds

KAZUHIKO HANAI, AKIHIRO NOGUCHI, TAKACHIYO OKUDA

メタンスルホンアニリドおよびその重水素化合物の赤外吸収スペクトル

花井一彦, 野口章公, 奥田高千代

一置換スルホンアミド類の振動スペクトルに関する研究の一環として本報では, すでにX線解析によって分子のコンホーメーションが明らかにされているメタンスルホンアニリド $\text{CH}_3\text{SO}_2\text{NHC}_6\text{H}_5$ (MSAn) の赤外吸収スペクトルを同位体シフトによって解析した。重水素化合物としては3種類のC-重水素化合物 $\text{CD}_3\text{SO}_2\text{NHC}_6\text{H}_5$, $\text{CH}_3\text{SO}_2\text{NHC}_6\text{D}_5$, $\text{CD}_3\text{SO}_2\text{NHC}_6\text{D}_5$ を常法により合成し, N-重水素化合物と合わせて全部で8種類の同位元素化合物の赤外吸収スペクトルを測定した。これらのスペクトルを相互に比較することにより大部分の吸収帯を $\text{CH}_3\text{SO}_2\text{NH}$ -部分とベンゼン環部分に分けて帰属することができた。MSAn およびそのC-重水素化合物はN-重水素化により $1450 \sim 550\text{cm}^{-1}$ において特徴的な変化を示す ($1415 \sim 1396\text{cm}^{-1}$, $1221 \sim 1168\text{cm}^{-1}$, $925 \sim 896\text{cm}^{-1}$, $663 \sim 650\text{cm}^{-1} \rightarrow 1240 \sim 1186\text{cm}^{-1}$, $1069 \sim 1049\text{cm}^{-1}$, $852 \sim 830\text{cm}^{-1}$, $565 \sim 554\text{cm}^{-1}$)。これらの吸収帯はNH変角振動(δNH), CN伸縮振動, SN伸縮振動およびNH変角振動($\delta'\text{NH}$)によるもので, このスペクトル変化はこれらの振動が相互にカップリングしていることによるものとして説明することができる。同様のスペクトル変化はSN結合に関してMSAnと同じコンホーメーションをとるN-(*p*-bromophenyl)-*p*-chlorobenzenesulfonamide やその他のN-arylsulfonamide 類にも見出されることから, N-重水素化によるこのようなスペクトル変化はC-SO₂NH-C_{arom}に特徴的なものと考えられる。